

ESTRUCTURA ATOMICALliçó 1.- Orígens de la Mecànica Quàntica

Introducció.- Radiació del cos negre.- Espectres atòmics. Principi de combinació de Rydberg-Ritz.- Models atòmics de Rutherford i de Bohr.- Efecte fotoelèctric.- Dualisme ona-corpúscle: hipòtesi de De Broglie.

Lliçó 2.- Postulats de la Mecànica Quàntica

Algebra d'operadors.- Postulats de la Mecànica Quàntica. Equació de Schrödinger.- Significat físic de la funció d'ona.- Estats estacionaris.- Conseqüències dels postulats. Principi d'incertesa de Heisenberg.

Lliçó 3.- Partícula en pous de potencial

Introducció.- Partícula lliure.- Partícula en una caixa unidimensional.- Partícula en una caixa tridimensional. Estats degenerats.- Barreres de potencial: efecte túnel.

Lliçó 4.- Moment angular

El moment angular en Mecànica Quàntica.- Relacions de commutació.- Valors propis i funcions pròpies dels operadors  $L^2$  i  $L_z$ .- Harmònics esfèrics.

Lliçó 5.- Atoms d'hidrogen

El problema de dos cossos.- Resolució de l'equació de Schrödinger per a l'àtom d'hidrogen i els ions hidrogenoides.- Orbitals hidrogenoides: concepte i significat físic.- Representació dels orbitals hidrogenoides.- Interacció amb un camp magnètic: quantització espacial.

Lliçó 6.- El spin electrònic

El spin electrònic: base experimental i formulació mecano- quàntica.- Operadors del moment angular de spin. Funcions i valors propis.- Moment angular total.- Estructura fina de l'espectre dels àtoms monoelèctrics.

Lliçó 7.- Mètodes aproximats

L'equació de Schrödinger per a l'àtom d'heli.- El mètode variacional. Teorema d'Eckart.- El mètode de pertorbacions independent del temps.- Aplicació d'ambdós mètodes a l'estudi de l'àtom d'heli.

Lliçó 8.- Atoms polielectrònics

Equació de Schrödinger pels àtoms polielectrònics.- Mètode del camp autoconsistent de Hartree. Orbitals atòmics.- Principi d'exclusió de Pauli. Determinants de Slater.- Principi Aufbau. Sistema periòdic dels elements.- Termes espectrals corresponents a una configuració electrònica. Regles de Hund.- Espectres dels metalls alcalins.- Efecte Zeeman.

## ESTRUCTURA MOLECULAR

### Lliçó 9.- L'enllaç químic

Introducció.- Tipus d'enllaç químic.- Aproximació Born- Oppenheimer. Concepte de superfície de potencial.- Equació de Schrödinger per a la molècula  $H_2^+$ .- Orbitals moleculars.- Aproximació CLOA.- Interpretació mecano-quàntica de l'enllaç químic.

### Lliçó 10.- La molècula d'hidrogen

Introducció .- Tractament de la molècula d'hidrogen pel mètode d'orbitals moleculars.- Tractament pel mètode d'enllaç de valència.- Comparació dels dos mètodes.

### Lliçó 11.- Molècules diatòmiques

Tractament pel mètode d'orbitals moleculars.- Diagrama de correlació.- Estats electrònics.- Molècules diatòmiques homonuclears i heteronuclears.- Tractament pel mètode d'enllaç de valència.

### Lliçó 12.- Molècules poliatòmiques

Introducció.- Tractament pel mètode d'enllaç de valència. Hibridació. Mesomeria.- Tractament pel mètode d'orbitals moleculars.- Mètode de Hückel.- Índexs de reactivitat. Diagrames moleculars.

## ESPECTROSCOPIA MOLECULAR

### Lliçó 13.- Introducció a l'espectroscòpia molecular

Mètodes experimentals per a determinar l'estructura molecular.- Interacció entre matèria i radiació.- Estudi de les transicions induïdes per teoria de pertorbacions.- Moment de transició i regles de selecció.- Tipus d'espectroscòpia.

### Lliçó 14.- Espectres de rotació pura

Molècules diatòmiques: aproximació del rotor rígid.- Regles de selecció i intensitat de les transicions.- Efecte Stark.- Rotor no rígid.- Espectres rotacionals de molècules poliatòmiques.

### Lliçó 15.- Espectres de vibració

Molècules diatòmiques: aproximació de l'oscil·lador harmònic.- Regles de selecció.- Població dels nivells vibracionals.- Anarmonicitat.- Energia de dissociació.- Espectres de vibració de molècules poliatòmiques. Modes normals de vibració.

#### Lliçó 16.- Espectres de rotació-vibració

Molècules diatòmiques: model rotor rígid-oscil·lador harmònic.- Regles de selecció i intensitat de les transicions.- Acoblament rotació-vibració.- Molècules poliatòmiques. Bandes paral·leles i perpendiculars.

#### Lliçó 17.- Espectres electrònics

Molècules diatòmiques: transicions permeses i prohibides.- Estructura vibracional de les bandes electròniques.- Principi de Franck-Condon.- Energia de dissociació.- Estructura rotacional de les bandes electròniques.- Espectres electrònics de molècules poliatòmiques.- Fluorescència i fosforescència.

### CINETICA QUIMICA

#### Lliçó 18.- Cinètica formal

Introducció.- Velocitat de reacció.- Equació de velocitat.- Molecularitat i ordre.- Intergració de les equacions de velocitat.- Anàlisi de les dades cinètiques.- Reaccions complexes: reversibles, consecutives i paral·leles.- Hipòtesi de l'estat estacionari.

#### Lliçó 19.- Teoria de colisions

Cinètica molecular.- Efecte de la temperatura sobre la velocitat de reacció. Equació d'Arrhenius.- Teoria clàssica de colisions.- Comparació amb els resultats experimentals. Factor esfèric.

#### Lliçó 20.- Teoria de l'estat de transició

Superfícies d'energia potencial.- Càlcul de la constant de velocitat. Hipòtesi de l'equilibri.- Comparació amb la teoria de colisions.- Formulació termodinàmica de la velocitat de reacció. Entropia d'activació.

#### Lliçó 21.- Reaccions en fase gasosa

Introducció.- Reaccions bimoleculares i trimoleculares.- Reaccions unimoleculares. Teoria de Lindemann.- Reaccions en cadena lineal i en cadena ramificada. Límits d'explosió.

#### Lliçó 22.- Catàlisi

Introducció.- Tipus de catàlisi.- Catàlisi àcid-base específica i general.- Catàlisi enzimàtica. Equació de Michaelis-Menten.- Catàlisi heterogènea.

## BIBLIOGRAFIA

### Textos de Química Física

- Atkins, P.W., "Physical Chemistry", Oxford University Press, 1983.
- Berry, R.S., Rice, S.A. i Ross, J., "Physical Chemistry", Wiley, New York, 1980.
- Díaz Peña, M. i Roig Muntaner, A., "Química Física", Alhambra, Madrid, 1972, 1975.
- Levine, I.N., "Fisicoquímica", McGraw-Hill, Bogotá, 1978.
- Moore, W.J., "Physical Chemistry", Longman, Londres, 1974.

### Monografies

- Karplus, M. i Porter, R., "Atoms and Molecules", Benjamin, New York, 1970.
- Levine, I.N., "Química Cuántica", AC, Madrid, 1974
- Banwell, C.N., "Fundamentals of Molecular Spectroscopy", McGraw-Hill, New York, 1973
- Barrow, G.M., "Introduction to Molecular Spectroscopy", McGraw-Hill, New York, 1963
- Laidler, K.J., "Cinética de reacciones", Alhambra, Madrid, 1966

Professor: Andrei CLIVA

curs : 3er

Visti plan,



Signat:



Cap de Departament

Data: 4-2-20